

CARACTERIZACIÓN DE SISTEMAS BASADOS EN CARBAZOL CON TRANSFORMACION REVERSIBLE ENTRE BIRRADICAL AISLADO Y σ -AGREGADOS

I. Badía-Domínguez¹, S. Gámez-Valenzuela¹, C. Capel-Ferrón¹, R. Ponce Ortiz¹, Juan T. López Navarrete¹, V. Hernández Jolín¹, F. Hartl², H. Li³, M. Carmen Ruiz Delgado¹

¹ Department of Physical Chemistry, University of Malaga, Campus de Teatinos s/n, 229071, Malaga, Spain, irenebadia94@hotmail.com

² Department of Chemistry, University of Reading, Whiteknights, Reading RG6 6AD, United Kingdom.

³ Key Laboratory of Synthetic and Self-assembly Chemistry for Organic Functional Materials, Shanghai Institute of Organic Chemistry, Chinese Academy of Sciences, No.345 Lingling Rd., Shanghai, 200032, China.

Palabras Clave: *compuestos π -conjugados, carbazol, birradical, Raman*

El desarrollo de la química de moléculas orgánicas π -conjugadas que tienen una capa de valencia que no está completamente llena, también conocidas como sistemas de capa abierta, ha atraído mucho interés en estos últimos años. Estos sistemas presentan gran ventaja para aplicaciones en espintrónica, electrónica orgánica u óptica no lineal, entre otros.[1] Sin embargo, los sistemas π -conjugados con carácter birradical suelen ser poco estables a temperatura ambiente. Por tanto, el diseño y caracterización de compuestos birradicales estables presenta hoy en día un gran interés.[2] En este trabajo, presentamos un estudio experimental y teórico, basado en espectroscopias Raman y UV-Vis-NIR junto con cálculos DFT, de un compuesto bicarbazol que presenta transformaciones termocrómicas y piezocrómicas reversibles entre una especie quinoide de capa cerrada y otra especie birradical de capa abierta que forma agregados mediante enlaces de tipo- σ .

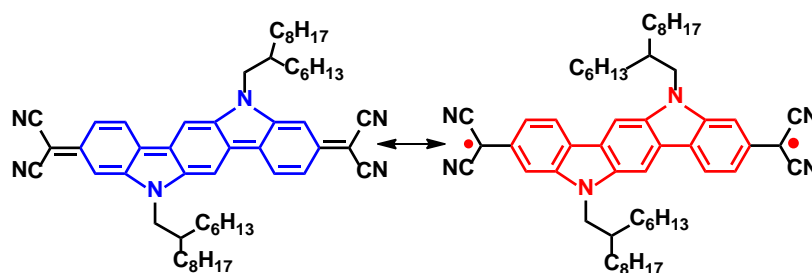


Figura 1. (Izquierda) estructura quinoide de capa cerrada y (derecha) estructura birradical de capa abierta del sistema basado en bicarbazol a estudio.

Referencias

- [1] a) M. Abe, *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 7011-7088; b) Z. Zeng, X. Shi, C. Chi, J.T. L. Navarrete, J. Casado, J. Wu, *Chem. Soc. Rev.* 2015, *44*, 6578-6596.
[2] D. Wang, C. Capel Ferrón, J. Li, R. Ponce Ortiz, J. T. López Navarrete, V. Hernández Jolín, X. Yang, B. de Bruin, F. Hartl, M. C. Ruiz Delgado, H. Li, *submitted*.